

ラチェット系における熱ゆらぎ誘起エネルギー変換の研究

著者	?城 史子
号	43
学位授与番号	1735
URL	http://hdl.handle.net/10097/38710

氏名・(本籍)	たかぎふみこ 高城史子
学位の種類	博士(理学)
学位記番号	理博第1735号
学位授与年月日	平成12年3月23日
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当
研究科, 専攻	東北大学大学院理学研究科(博士課程)物理学専攻
学位論文題目	ラチェット系における熱ゆらぎ誘起エネルギー変換の研究
論文審査委員	(主査) 教授 大木 和 夫 教授 倉本 義 夫 助教授 宮田 英 威, 佐野 雅 己(電気通信研究所)

論 文 目 次

- 1 Introduction
 - 1.1 生物のなかの物理
 - 1.1.1 分子モーター
 - 1.1.2 ミクロとマクロの間
 - 1.1.3 tight vs. loose — 熱ゆらぎの役割
 - 1.1.4 ラチェット系
 - 1.2 本論文の目的
 - 1.3 本論文の構成
- 2 熱ゆらぎを利用して仕事を取り出す — Ratchet systems
 - 2.1 A. F. Huxley の'57年モデル
 - 2.2 Feynman's Ratchet
 - 2.3 分子モーターのモデルとしてのラチェット — Vale-Oosawa のモデル
 - 2.4 Forced thermal ratchet — Magnasco の主張
- 3 Stochastic energetics
 - 3.1 ミクロとマクロ
 - 3.2 Stochastic energetics
- 4 Stochastic energetics の応用 — Molecular Carnot cycles
 - 4.1 モデル
 - 4.2 等温過程
 - 4.3 断熱過程
 - 4.4 “クラッチ” の操作
 - 4.5 エネルギー変換効率 — 準静的な場合
- 5 Forced thermal ratchet のエネルギー論的考察
- 6 Oscillating ratchet

6.1 oscillating ratchet

6.2 Forced thermal ratchet におけるエネルギー変換再考

7 Conclusion

7.1 まとめ

7.2 今後の課題

A アンサンブル平均の計算

B Feynman's ratchet の不可逆性

参考文献

論文内容要旨

生物のさまざまな運動や細胞内輸送を担う生体内分子モーターは、入力エネルギーと同程度の熱ゆらぎを受けているにもかかわらず、50%を越える高い効率で動作することが知られている。近年実験技術の向上にともなって分子モーターに関する1分子レベルの測定が可能になってきているが、その運動機構や、熱ゆらぎの中でなお高い効率で動作できる理由はいまだ解明されていない。これらの解明は、生物学的にはもちろんのこと、非平衡熱統計力学としても非常に興味深い問題である。

この分子モーターの動作機構を理解する足掛かりとして、近年ラチェット系に関する研究が多くなされている。ラチェット系は、非対称な周期ポテンシャル（ラチェットポテンシャル）中の Brown 粒子からなる系に、何らかの非平衡性をあたえる—非熱的なゆらぎを加えたり、2つの異なる温度の熱浴に同時に接触させる等—ことにより、方向性をもった（非対称な）動きを得ることができる系である。このような系は、古くは Feynman 等の教科書に熱ゆらぎから仕事を取り出す例として考察されている。また最近では分子モーターの簡単なモデルとして研究が行なわれている。分子モーターは、極性を持つ polymer であるレールタンパクと、その上を ATP という分子を加水分解して得られたエネルギーを用いて一方向運動をするモータータンパクとから構成される。極性と繰り返し構造を持つレールタンパクとその上を動くモータータンパクとの相互作用ポテンシャルをラチェットポテンシャル、レールとモータータンパク間の相対運動を粒子の運動と対応づけたのが分子モーターのラチェットモデルである。ATP 加水分解のエネルギーは系の非平衡状態を保つのに使われていると考えている。

分子モーターは、一種のエネルギー変換装置（化学エネルギーから力学エネルギーへの）と考えることができる。この動作原理を理解する上で、効率は重要な量であると考えられる。ところがこれまでのラチェット系研究の多くは確率流の解析のみにとどまっており、効率などのエネルギー論的解析はほとんどなされていない。ラチェット系の多くは、実際には Langevin 方程式によって記述解析がなされており、このような系でのエネルギー論的解析を行なうための方法が確立されていなかったためと考えられる。しかし、最近関本等により Langevin 系で「熱」や「仕事」を取り扱うための方法、“stochastic energetics” が定式化されつつある。この方法は、平衡状態においては熱力学と無矛盾であることが確かめられている。そこで本研究では、この stochastic energetics を用いてラチェット系のエネルギー論的研究を行った。

さて、本研究では、ラチェット系のエネルギー変換に対する熱ゆらぎの影響についての解析を行なった。前述したように、分子モーターは熱エネルギーの高々数倍から数十倍程度の入力エネルギーで高い効率で働くことが実験的に知られている。このことから、分子モーターは熱ゆらぎを積極的に利用して

いるのではないかと、熱ゆらぎは分子モーターの動作に重要な役割を果たしているのではないかという期待が持たれている。しかし、一般に熱ゆらぎは「機械」の操作を妨げるものと考えられており、熱ゆらぎが系の効率を高めるような例は想像し難い。そこで簡単な例として、周期的な外力を加えたラチェット系について考察を行ない、熱ゆらぎの存在がこの系の効率にどのような影響を与えるかを解析した。

具体的には、Brown 粒子に乗法的な外力が加えられる *oscillating ratchet* 系と、加法的な外力が加えられる *forced thermal ratchet* 系について考察を行なった。これらの系では、振動する外力によって系に注入された（方向性のない）エネルギーによって方向性をもった確率流が生じる。この確率流の向きと反対向きに力（負荷）をかけると、負荷に逆らう流れすなわち、マクロな仕事を取り出すことができる。これらの系の効率について解析した結果、どちらの系においても「熱ゆらぎによって系のエネルギー変換が促進される場合がある」ということが明らかとなった。また、そのメカニズムを考察することにより、この熱ゆらぎによるエネルギー変換の促進は、本研究で扱った系に特別なものではなく、他のラチェット系においても広く見られると期待できることがわかる。この結果は、分子モーターのような *nano machine* において熱ゆらぎが重要な役割を果たす可能性を示唆するものである。

論文審査の結果の要旨

生物が備える化学エネルギーと力学エネルギーの変換機構は最も重要な生物機能の一つであり、筋の収縮機構が精力的に研究されて来た。分子レベルでの研究の進展はこれを生体分子モーターとして理解できる段階にまで来ている。この分子モーターは熱ゆらぎの中で高い効率で作動しており、その機構を解明することは非平衡統計力学としても興味深い問題である。実際に、生体分子モーターの動作機構をアクチンのレール上のミオシン頭部の運動としたモデルでラチェット系の研究が多くなされている。しかし、これらの研究でエネルギー論的な考察はほとんど行なわれていない。そこで申請者は「避け得ない熱ゆらぎの中で高い効率で動作する」分子モーターのメカニズムでは、エネルギー変換の効率に関する考察が重要であるとの視点から、「熱ゆらぎがエネルギー変換に積極的な役割を果し得るか否か」の問題を解明することを研究目的とした。

本論文で、Langevin系で「熱」や「仕事」を取り扱う方法として定式化されつつある'stochastic enegetics'の方法を用いている。申請者は先行するMagnascoの研究の誤りを指摘した後、新たに導入したOscillating ratchet系とForced thermal ratchet系(Magnascoのモデル)のいずれにおいても、熱ゆらぎがラチェット系のエネルギー変換を促進する場合があることを具体的な計算により初めて明らかにしている。さらに、系のエネルギー変換効率が2つの時間スケール(系の緩和とポテンシャル変動)の比に依存していることも明らかにした。

以上の結果は「熱ゆらぎがエネルギー変換に積極的な役割を果し得る」ことを示唆しており、分子モーターのようなnano machineにおいて熱ゆらぎが果たす役割の可能性を示すことに成功している。これは分子レベルで進められている生体分子モーターの生物学的な機構の研究にも大いに寄与するものである。

この論文は申請者が自立して研究活動を行うに必要な高度の研究能力と学識をもつことを示している。したがって、高城史子提出の論文は、博士(理学)の学位論文として合格と認める。